数理解析研究所講究録
990巻 1997年 11-20

Rank Revealing QR 分解による悪条件線形方程式の解法

仲田 晋 (Susumu Nakata) 北川 高嗣 (Takashi Kitagawa)
筑波大学理工学研究科 筑波大学電子情報工学系

1 はじめに

本研究の目的は悪条件線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の新しい解法の提案である。悪条件線形方程式の数値解法は多くの研究があるが、代表的な解法の1つに特異値分解による方法がある。それに対し、特異値分解を用いる方法に較べ計算量が少ない、3回の QR 分解を用いる方法が提案された [1]。しかし、この方法で用いるピボッティング付 QR 分解 [7] は、あるクラスの係数行列に対し数値的階数を正確に検出できない場合があり [5]、この場合計算不能に陥る。

本稿では、この問題を解決する方法として Rank Revealing QR 分解 [2] を導入することを提案し、その有効性を数値実験によって検証する。

第2節では、悪条件線形方程式の近似解として本研究で用いた打ち切り最小2乗最小ノルム解 [1] の定義とそのアルゴリズムを与える。第3節では Rank Revealing QR 分解の定義と、本研究の目的である Rank Revealing QR 分解を用いた打ち切り最小2乗最小ノルム解のアルゴリズムを示し、第4節ではその有効性を数値実験により示す。

2 打ち切り最小2乗最小ノルム解

2.1 打ち切り最小2乗最小ノルム解の定義

本研究では、悪条件線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ ($A \in \mathbf{R}^{m\times n}, \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n, \boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^m$) の近似解として打ち切り最小2乗最小ノルム解 [1] を用いた。

ここで、係数行列 A の条件数は $cond(A) = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n}$ (σ_1:A の最大特異値、σ_n:A の最小特異値) で定義され、条件数が大きい場合、特に ε_M^{-1} (ε_M : 計算機イプシロン) と同程度もしくはそれ以上である場合この方程式は悪条件であるという [7]。

打ち切り最小２乗最小ノルム解は次のように定義される。

定義 2.1 (打ち切り最小２乗最小ノルム解) 線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の係数行列 A が次の形に分解されたとする。

$$A = URDV^T \tag{1}$$

$$D \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} diag(d_1, d_2, \ldots, d_k), d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_k > 0$$

ここで k は A の数値的階数、$U \in \mathbf{R}^{m\times k}, V \in \mathbf{R}^{k\times n}$ は正規直交行列、$R \in \mathbf{R}^{k\times k}$ は悪条件でない上三角行列、$D \in \mathbf{R}^{k\times k}$ は対角行列である。

ここで $\varepsilon > 0$ を与え、$\boldsymbol{c} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} U^T\boldsymbol{b} = (c_1, \ldots, c_k)^T$ とし、$\sum_{i>n_\varepsilon} c_i^2 < \varepsilon^2$ を満たす最小の n_ε に対し、

$$A_{n_\varepsilon} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} URD_{n_\varepsilon}V^T, (D_{n_\varepsilon} \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} diag(d_1, \ldots, d_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)) \tag{2}$$

を係数とする方程式

$$A_{n_\varepsilon}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{3}$$

の最小２乗最小ノルム解を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の打ち切り最小２乗最小ノルム解という。

ここで、打ち切り最小２乗最小ノルム解の残差は ε より小さくなることが保証されており、ε は残差の許容誤差限界と呼ばれる。

この定義より、線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の打ち切り最小２乗最小ノルム解 $\boldsymbol{x}_{n_\varepsilon}$ は (3) 式の最小２乗最小ノルム解であり、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{n_\varepsilon} &= A_{n_\varepsilon}^\dagger \boldsymbol{b} \\ &= VD_{n_\varepsilon}^\dagger R^{-1}U^T\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

$(D_{n_\varepsilon}^\dagger = diag(1/d_1, \ldots, 1/d_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0))$ で与えられる。ここで、† は一般逆行列 [8] を表す。

2.2 打ち切り最小２乗最小ノルム解のアルゴリズム

以下、最小２乗最小ノルム解を求めるアルゴリズムを、特異値分解を用いた場合と３回の QR 分解を用いた場合について示す [1]。

アルゴリズム 2.1 (特異値分解を用いたアルゴリズム)

1. A の特異値分解

$$\begin{aligned} A = & \ U\Sigma V^T \\ = & \ U \begin{bmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_k \end{bmatrix} V^T \quad (\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_k > 0) \end{aligned}$$

(k : A の数値的階数, $U \in \mathbf{R}^{m\times k}, V \in \mathbf{R}^{k\times n}$: 正規直交行列, $\Sigma \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 対角行列)

を計算する。この分解は Householder 変換による二重対角化、 QR 法による対角化、という 2 つの段階によって得られる [7]。

2. $\boldsymbol{c} \leftarrow U^T \boldsymbol{b}$

3. $\sum_{i=n_\varepsilon}^{k} c_i^2 < \varepsilon$ を満たす最小の n_ε に対し、

$\boldsymbol{x}_{n_\varepsilon} \leftarrow V\Sigma_{n_\varepsilon}^{\dagger}\boldsymbol{c}$

但し、 $\Sigma_{n_\varepsilon}^{\dagger} = diag(1/\sigma_1, \ldots, 1/\sigma_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)$

ここで、近似解 $\boldsymbol{x}_{n_\varepsilon}$ の誤差は

$$E(n_\varepsilon) \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \sum_{i>n_\varepsilon} \left(\frac{c_i^2}{\sigma_i^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

で表され、収束が早ければ

$$\tilde{E}(n_\varepsilon) \stackrel{\mathrm{d}}{\equiv} \left|\frac{c_{n-1}}{\sigma_{n-1}}\right| + \left|\frac{c_n}{\sigma_n}\right|$$

により誤差を推定できる。

アルゴリズム 2.2 (3 回の QR 分解によるアルゴリズム)

1. ピボッティング付修正グラムシュミット法 [7] を用い、 A を次のように QR 分解する。

$$\begin{aligned} AP &= Q_1 DS && (4) \\ &= Q_1 \begin{bmatrix} d_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & s_{12} & \cdots & s_{1k} & \cdots & s_{1n} \\ & 1 & \ddots & & & \vdots \\ & & \ddots & s_{k-1k} & & s_{k-1n} \\ 0 & & & 1 & \cdots & s_{kn} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$(d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_k > 0)$

(k : A の数値的階数, $Q_1 \in \mathbf{R}^{m\times k}$: 列正規直交行列, $D \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 対角行列, $S \in \mathbf{R}^{k\times n}$: 悪条件でない上三角行列、 $P \in \mathbf{R}^{n\times n}$: 列ピボッティング行列)

2. S^T の QR 分解 $S^T = Q_2 L^T$ ($L \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 下三角行列, $Q_2 \in \mathbf{R}^{n\times k}$: 列正規直交行列) を計算。

3. $M \leftarrow DLD^{-1}$

4. M の QR 分解 $M = Q_3 R$($R \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 上三角行列, $Q_3 \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 正規直交行列) を計算。

この時点で、 $AP = Q_1 Q_3 R D Q_2^T$ と分解したことになり、式 (1) の形になる。したがって打ち切り最小 2 乗最小ノルム解は定義 2.1に基づいて以下のように計算する。

5. $\boldsymbol{c} \leftarrow Q_3^T Q_1^T \boldsymbol{b}$

6. $\sum_{i=n_\varepsilon}^{n} c_i^2 < \varepsilon$ を満たす最小の n_ε に対し、
$\boldsymbol{c}_{n_\varepsilon} \leftarrow (c_1, \ldots, c_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)^T$

7. $R\boldsymbol{y} = \boldsymbol{c}_{n_\varepsilon}$ を、逆代入で解く。

8. $\boldsymbol{x}_{n_\varepsilon} \leftarrow P Q_2^T D_{n_\varepsilon}^{\dagger} \boldsymbol{y}$ 但し、 $D_{n_\varepsilon}^{\dagger} = diag(1/d_1, \ldots, 1/d_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)$

2.3 3回の QR 分解を用いたアルゴリズムの問題点

アルゴリズム 2.2の step 1 での QR 分解 (4) は、 A の悪条件性は対角行列 D のみに反映され、上三角行列 S は悪条件でないと仮定している。しかし通常の列ピボッティング付 QR 分解では、 A の悪条件性が S に反映される場合もあり得る [5]。式 (4) において、 A の数値的階数は対角行列 D の対角要素の大きさで決定しなければならないが、稀に上三角行列 S が悪条件となり、対角行列 D で決定した数値的階数 k が、必ずしも A の数値的階数を表すとは限らない、ということを意味する。

この場合、次のような問題が生じる。式 (4) において S が悪条件である時、 S の悪条件性が step 4 の上三角行列 R に反映される。 R が悪条件となると、 R が数値的に正則でなくなり step 7 の逆代入が計算できない恐れがある。

これは、1回目の QR 分解において、通常の列ピボッティング付 QR 分解では正確な数値的階数を検出できないことに起因する。

そこで、1回目の QR 分解では A の数値的階数を正確に検出し、上三角行列 S が悪条件とならない QR 分解を行わなければならない。

3 Rank Revealing QR 分解の導入

3.1 Rank Revealing QR 分解

前節で述べた問題点を改善するため、A の数値的階数を正確に検出できる Rank Revealing QR 分解を用いることを提案する。Rank Revealing QR 分解は、次のように定義される [2][3]。

定義 3.1 (Rank Revealing QR 分解)
行列 $A \in \mathbf{R}^{m\times n}$ の QR 分解

$$\begin{aligned} A\Pi &= QR \\ &= Q\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{5}$$

($\Pi \in \mathbf{R}^{n\times n}$: 列置換行列, $Q \in \mathbf{R}^{m\times m}$: 正規直交行列, $R_{11} \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 上三角行列, k:A の数値的階数)
が

$$\begin{gathered} cond(R_{11}) \approx \sigma_1/\sigma_k \\ \sigma_k \gg \sigma_{k+1} = O(\|R_{22}\|_2) \end{gathered} \tag{6}$$

という条件を満たすような置換行列 Π が存在する時、この QR 分解を Rank Revealing QR 分解という。

ここで、Rank Revealing QR 分解と数値的階数との関係は次のようになる。

定理 3.2 [3] $A \in \mathbf{R}^{m\times n}$ の QR 分解 $A = QR$, $R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix}$, $R_{11} \in \mathbf{R}^{k\times k}$
が

$$\sigma_{min}(R_{11}) \gg \|R_{22}\|_2 = O(\varepsilon_M)$$

を満たす時、A の数値的階数は k である。

また、任意の行列 A に対して Rank Revealing QR 分解が存在することは証明されている [3]。

Rank Revealing QR 分解を行うためには、条件 (6) を満たすような直交行列 Π を選ぶことが必要となるが、ランク落ちが 1 つの場合、この置換行列は次の定理によって決定できる。

定理 3.3 [2] σ_n : Aの最小特異値, $\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{R}^n$: 最小特異値に対する右特異ベクトル($\|\boldsymbol{v}\| = 1$) とする。このとき、置換行列 Π が

$$|(\Pi^T v)_n| = \|v\|_\infty$$

を満たす時、 $A\Pi$ の QR 分解

$$A\Pi = QR$$

は $r_{nn} \leq \sqrt{n}\sigma_n$ を満たす。

ランク落ちが 2 つ以上の場合でも、同様の操作で置換行列を決定できる。

ここで、具体的な Rank Revealing QR 分解のアルゴリズムを示す [2]。

アルゴリズム 3.1 (Rank Revealing QR 分解)

通常の列ピボッティング QR 分解 (ピボッティング付修正グラムシュミット法) を用い、 $A\Pi = QR(\Pi \in \mathbf{R}^{n\times n}, Q \in \mathbf{R}^{m\times k}, R \in \mathbf{R}^{k\times n})$ と分解し、 $i = n, n-1, \ldots$ について以下を行なう。

1. R の左上 $i \times i$ 部分行列 $R^{(i)}$ の最小特異値 σ_i と、それに対応する右特異ベクトル $\boldsymbol{w}^{(i)}$ を計算する。但し、最小特異値、特異ベクトルの計算には Inverse Iteration[9] を用いる。

2. $|({P^{(i)}}^T \boldsymbol{w})_n| = \|\boldsymbol{w}\|_\infty$ を満たすような置換行列を $P^{(i)}$ とする。

3. QR 分解 $R^{(i)}P^{(i)} = Q_1\tilde{R}_{11}$ を Givens 変換 [5] により行う。

4. $$\begin{aligned} \Pi &\leftarrow \Pi P^{(i)} \\ Q &\leftarrow Q\begin{bmatrix} Q_1 & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \\ R &\leftarrow \begin{bmatrix} \tilde{R}_{11} & Q_1^T R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

5. $\sigma_i > \varepsilon_M$ (計算機イプシロン) のとき終了

3.2 3回の QR 分解によるアルゴリズムへの Rank Revealing QR 分解の導入

ピボッティング付修正グラムシュミット法では、分解 (4) において上三角行列 S に悪条件性が反映される恐れがあることが問題となっていた。一方、 Rank Revealing QR 分解 (5) では次のようになる。

式 (5) は、定義より $\|R_{22}\| \approx \varepsilon_M$ で、かつ定理 3.2より k が A の数値的階数であることが保証されている。従って $R_{22}=0$ とみなし、改めて

$$
\begin{aligned}
A\Pi &= QR \\
&= Q[\ R_{11} \quad R_{12}\ ]
\end{aligned}
$$

$$(Q \in \mathbf{R}^{m\times k}, R \in \mathbf{R}^{k\times n}\text{上三角行列}, k : A\text{の数値的階数})$$

と表し、さらに R の対角要素を 対角行列 D で表し、

$$
\begin{aligned}
A\Pi &= QDS \\
&= Q \begin{bmatrix} d_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & s_{12} & \cdots & s_{1k} & \cdots & s_{1n} \\ & 1 & \ddots & & & \vdots \\ & & \ddots & s_{k-1k} & & s_{k-1n} \\ 0 & & & 1 & \cdots & s_{kn} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

とすれば、S が悪条件とならない。従って、 Rank Revealing QR 分解を用いることにより 2.3節で述べた問題点を回避できる。ここで、 Rank Revealing QR 分解を用いたアルゴリズムを示す。

アルゴリズム 3.2 (Rank Revealing QR 分解を用いた打ち切り最小2乗最小ノルム解のアルゴリズム)

1. Rank Revealing QR 分解 (アルゴリズム 3.1) により、A を次のように QR 分解する。

$$A\Pi = Q_1DS \tag{7}$$

(k : A の数値的階数, $Q_1 \in \mathbf{R}^{m\times k}$: 列正規直交行列, $D \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 対角行列, $S \in \mathbf{R}^{k\times n}$: 悪条件でない上三角行列、 $P \in \mathbf{R}^{n\times n}$: 列ピボッティング行列)

2. S^T の QR 分解 $S^T = Q_2 L^T$ ($L \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 下三角行列, $Q_2 \in \mathbf{R}^{n\times k}$: 列正規直交行列) を計算。

3. $M \leftarrow DLD^{-1}$

4. M の QR 分解 $M = Q_3 R$($R \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 上三角行列, $Q_3 \in \mathbf{R}^{k\times k}$: 正規直交行列) を計算。

5. $\boldsymbol{c} \leftarrow Q_3^T Q_1^T \boldsymbol{b}$

6. $\sum_{i=n_\varepsilon}^{n} c_i^2 < \varepsilon$ を満たす最小の n_ε に対し、
   $\boldsymbol{c}_{n_\varepsilon} \leftarrow (c_1, \ldots, c_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)^T$

7. $R\boldsymbol{y} = \boldsymbol{c}_{n_\varepsilon}$ を、逆代入で解く。

8. $\boldsymbol{x}_{n_\varepsilon} \leftarrow \Pi Q_2^T D_{n_\varepsilon}^\dagger \boldsymbol{y}$ 但し、$D_{n_\varepsilon}^\dagger = diag(1/d_1, \ldots, 1/d_{n_\varepsilon}, 0, \ldots, 0)$

4 数値実験

係数行列 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$:

$$A = diag(1, s, \ldots, s^{n-1}) \begin{bmatrix} 1 & -c & \cdots & -c \\ & 1 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -c \\ & & & 1 \end{bmatrix} \quad (c = 0.2, s = \sqrt{1-c^2})$$

右辺定数ベクトル $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$:

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{v}_1 \quad (\boldsymbol{v}_1 : A\text{の最大特異値に対する右特異ベクトル})$$

残差の許容誤差限界 $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-10}$

として数値実験を行なった。

係数行列 A は次のような性質を持つ。

- A の条件数は次のようになる。

n	50	100	150	180
cond(A)	4.99×10^4	2.18×10^9	7.26×10^{14}	3.26×10^{16}

表 1: 条件数

また、A は $n \approx 180$ 以上で数値的に正則でなくなるが、その時の数値的階数は $n-1$ である。

- ピボッティング付修正グラムシュミット法では列置換が行なわれず、式 (4) において上三角行列 S は悪条件となる。

それぞれのについて最小 2 乗最小ノルム解を計算した時の計算時間を図 1 に示す。ピボッティング付修正グラムシュミット法を用いた場合、$n \geq 195$ で計算不能となったが、これはアルゴリズム 2.2の step 7 において、上三角行列 R が正則でなくなり、逆代入の計算ができなかったことによる。

また、A の悪条件性が対角行列 D に反映されているかを調べるため、QR 分解を行なった時の最小対角要素 d_n と最小特異値 σ_n の関係を、図 2 に示す。この図より、Rank Revealing QR 分解を用いた場合は対角行列 D の最小対角要素が最小特異値に近い値のため、A の悪条件性が対角行列 D に反映されていることがわかる。

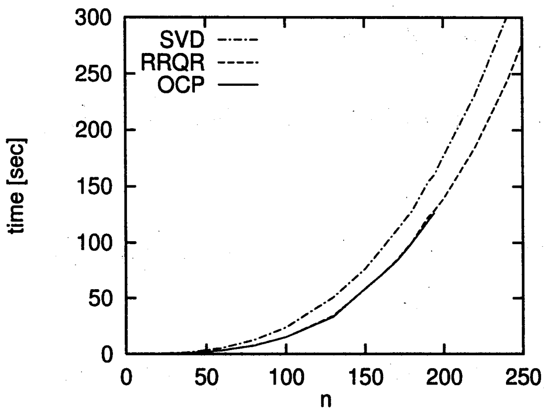

図 1: 計算時間の比較

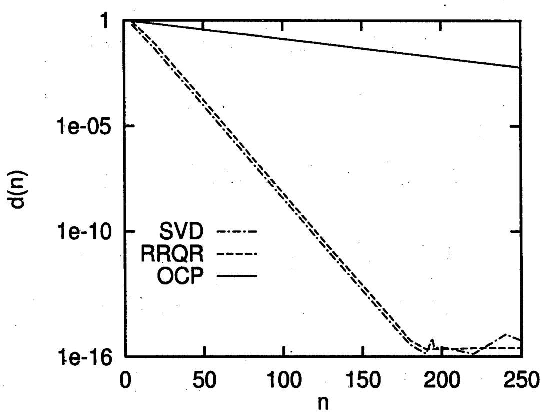

図 2: 最小対角要素の比較

但し、図中の表記はそれぞれ

SVD　: 特異値分解 (Singular Value Decomposition)

RRQR : Rank Revealing QR 分解

OCP　: ピボッティング付修正グラムシュミット法 (Ordinary Column Pivoting)

を表している。

5 まとめ

Rank Revealing QR 分解を導入した最小２乗最小ノルム解のアルゴリズムを提案し、その有効性を数値実験で確かめた。また、Rank Revealing QR 分解の導入による計算量の増加はわずかであることも確かめられた。

参考文献

[1] 細田陽介, 鳥居達生, 悪条件線形方程式に対する一つの直接解法, 日本応用数理学会論文誌,287-298,1994.

[2] T.F.Chan,*Rank Revealing QR-factorizations*,Linear Algebra Apl., **88/89**,67-82,1987.

[3] Y.P.Hong and C.-T.Pan,*Rank Revealing QR factorization and the Singular Value Decomposition*,Mathematics of Computation,**58**,213-232,1992.

[4] T.F.Chan and P.C.Hansen,*Some applications of the rank revealing QR factorization.* SIAM J.Sci.Stat.Comput.**13**,727-741,1992.

[5] G.H.Golub and C.F.Van Loan,*Matrix computations 2nd edn.*, Johns Hopkins Univ Press,1989

[6] T.F.Chan,*Low-rank Revealing QR Factorizations*,Numerical Linear Algebra with Applications,**1**(1994),33-34

[7] 中川徹, 小柳義夫, 最小二乗法による実験データ解析, 東京大学出版会,1982

[8] 柳井晴夫, 竹内啓, 射影行列・一般逆行列・特異値分解, 東京大学出版会,1983

[9] T.F.Chan,*Deflated decomposition of solutions of nearly singular systems*,SIAM J. Numer. Anal.,**21**(1984),738-754.